



(19) RU (11) 2075062 (13) C1  
(51) 6 G 01 N 21/35

Russian Committee  
for Patents and Trademarks

(12) ABSTRACT OF RUSSIAN PATENT

1

2

(21) 94042592/25

(22) 29.11.94

(46) 10.03.97

(71) 25 Государственный научно-исследовательский институт Министерства обороны РФ (по применению топлив, масел, смазок и специальных жидкостей – ГосНИИ по химмотологии)

(72) Чечкенов И. В., Сизов А. Б., Калинин Л. Л., Алаторцев Е. И., Вагин В. А., Балашов А. А., Веселов В. Г., Наметкин О. П., Лазарев Е. С., Шеленин А. М.

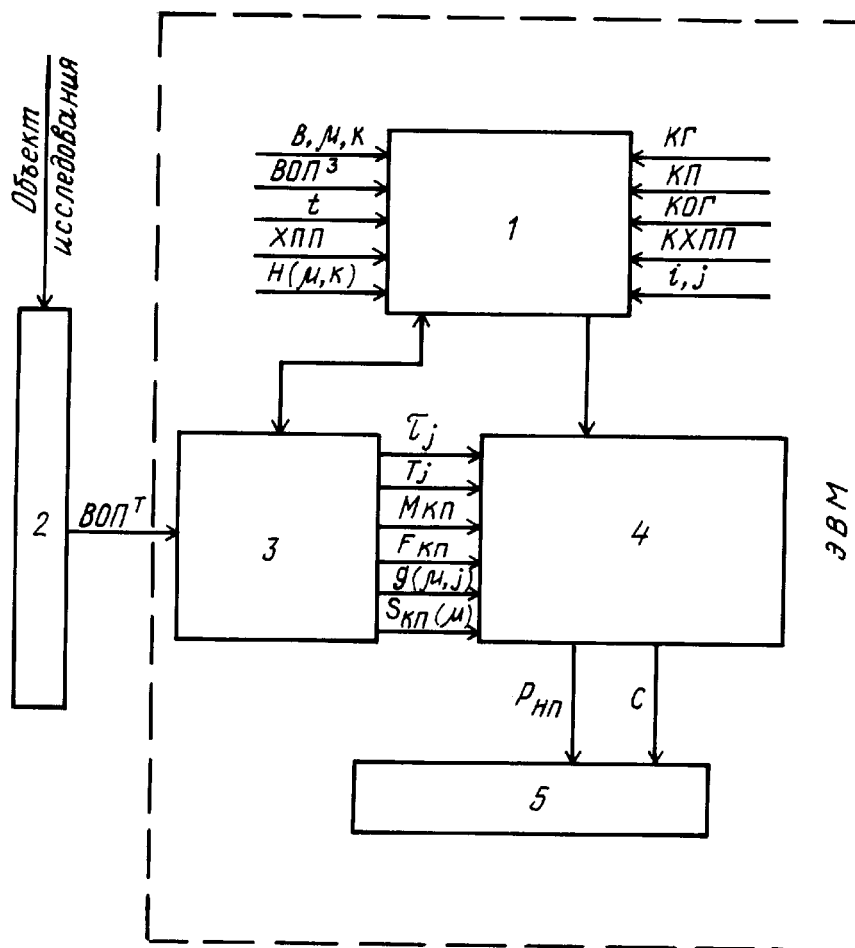
(73) 25 Государственный научно-

исследовательский институт Министерства обороны РФ (по применению топлив, масел, смазок и специальных жидкостей – ГосНИИ по химмотологии)

(56) 1. Anal. Chem. 1989, N 61, N 4, p. 313 – 320.  
2. Вершинин В. И. в сб. "Проблемы аналитической химии", т. IX – М.: Наука, 1989, с. 123 – 131.

(54) АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ СПОСОБ ИДЕНТИФИКАЦИИ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОНДИЦИОННОСТИ НЕФТЕПРОДУКТОВ

(57) Использование: анализ качества нефтепро-



RU 2075062 C1

дуктов, а именно идентификация и установление кондиционности нефтепродуктов с помощью ИК-излучения. Сущность: способ заключается в том, что для анализируемой пробы измеряют оптическую плотность при выбранных в ИК-диапазоне длинах волн. В базу данных ЭВМ вводят величины оптических плотностей стандартных образцов нефтепродуктов (НП) при заданных длинах волн в ИК-области спектра, а также показатели, характеризующие кондиционность стандартных образцов. При формировании базы данных образцы формируют в группы или марки НП. Для анализируемой пробы образца измеряют оптическую плотность при тех же заданных длинах волн. Предложены математические формулы для расчета численного пара-

метра, характеризующего близость величин оптических плотностей анализируемого образца и стандартных образцов. По максимальной величине численного параметра судят о принадлежности анализируемого образца к определенной группе или марке НП. После идентификации пробы проводят определение ее кондиционности. Определение кондиционности производят путем сравнения дифференциалов совместных плотностей распределения оптических плотностей пробы и стандартных образцов, принадлежащих к установленной группе или марке, по предложенным математическим формулам. Приведены критерии определения кондиционности НП. 1 табл. , 1 ил.

Изобретение относится к способам контроля качества нефтепродуктов, в частности к способам идентификации и установления кондиционности нефтепродуктов (НП) с помощью ИК–спектрофотометра, и может применяться в нефтеперерабатывающей, нефтехимической промышленности, а также во всех областях народного хозяйства, где используют нефтепродукты.

Как показала практика, необходимым и важным фактором обеспечения эффективного функционирования техники, использующей НП (топлива, масла, смазки и спецжидкости), является организация оперативного и надежного контроля качества НП.

Анализ состояния и тенденций развития способов и систем управления качеством (1 Тенденции развития лабораторных систем управления информацией. *Lims-Wohin gent der Fren d. Lab. Prax* 1989, 13. Sonderpy P. P. *Chromatogr. – Spectroskop* р. 96) продуктов переработки нефти и нефтехимического и органического синтеза показывает, что в последние годы особенно интенсивно развивается математическое обеспечение различных автоматизированных комплексов, в основу которых заложено применение хроматографических и спектроскопических методов анализа.

Для идентификации химического состава и молекулярной структуры различных веществ широкое распространение получили методы, использующие информационно-поисковые системы (ИПС) по молекулярным спектрам (2 – Информационная система "Сканенлек" для определения строения органических соединений с использованием спектроскопических данных. *Hiprc Z. Duttiban I. Liebarska P. Koziof I. Mazur M. Chemanal*, 1986, 31, N 4, p. 607–611).

Анализ научно-технических и патентных источников информации показал, что вопросы качественного и количественного анализов состава решаются в основном для однокомпонентных систем. Например, возможна идентификация топлив с использованием средств маркировки (3–А с. N 1607378. Средство маркировки жидких углеводородных топлив. 1990).

Известен также способ классификации моторных масел, включающий измерение количества стабильных свободных радикалов в навесе масла

до нагревания ампулы и в нагретом до  $200 \pm 2^\circ \text{C}$  масле в интервале 2,5–30 мин, определение начальной и конечной температуры работоспособности масла и вычисление по функциональной зависимости показателя классификационной группы масла (4 А с. N 1032380, G 01 N 27/10, G 01 N 33/26, "Способ классификации моторных масел и устройство для его осуществления", 1981). Однако этот способ имеет ограниченную область применения (для масел) и не может быть распространен без соответствующей доработки на классификацию топлив, спецжидкостей. Кроме того, этот способ не позволяет одновременно оценить качество масла.

Перед авторами стояла задача разработать такой способ идентификации и контроля качества НП, который позволил бы оперативно получить наиболее достоверные данные.

Наиболее близким по технической сущности к изобретению и взятым за прототип является способ компьютерной идентификации полиаренов в сложных смесях, реализованный на ЭВМ ЕС–1033, включающий измерение спектров поглощения, фиксирование наиболее интенсивных линий поглощения и сравнение измеренных параметров с заданными (эталонными), при этом эталонные спектры по атласу и названия соединений вводят в базу данных для каждого соединения с указанием длины волны (5 Информационная система "Спект–2" для компьютерной идентификации полиаренов в сложных смесях. Проблемы аналитической химии. М. Наука, 1989, т. 1X, с. 123–131).

Этому способу присущ тот же недостаток, что и вышеперечисленным, т. е. он не позволяет определять качество продуктов.

Техническая задача изобретения повышение достоверности и оперативности способа с одновременным увеличением информационности за счет того, что контролируется более широкий класс НП.

Указанная задача достигается тем, что в известном автоматизированном способе идентификации и определения кондиционности нефтепродуктов (НП), включающем измерение оптической плотности ИК–спектрофотометром в заданном диапазоне волновых чисел для каждой группы НП и сравнении измеренной величины с заданной, согласно изобретению задают количество групп или марок (КГ) НП, количество объектов в группе (КОГ), количество (КХГП) характеристик полос поглощения

(ХГП), величину оптической плотности (ВОГ<sup>3</sup>) для каждой ХГП каждого известного образца НП каждой группы НП, замеряют текущую величину

оптической плотности (ВОГ<sup>T</sup>) исследуемого объекта на всех ХГП, а принадлежность (идентификацию) объекта к *i*-той группе НП определяют по максимальной величине обобщенного показателя ( $P_{HM}$ ), рассчитываемого по следующей зависимости:

$$P_{HM} = \max(P(i), 1-P(i)),$$

где  $P(i)$  численный параметр, вычисляемый из равенства

$$\begin{aligned}
 & P(i) \log(P(i)) + (1-P(i)) \log(1-P(i)) = \\
 & = \frac{1}{KXПП} \left\{ \sum_{j=1}^{KXПП} \log(\tau_j^i \cdot B) - \sum_{j=1}^{KXПП} \frac{\tau_j^i}{\tau_1^i} \right\} \cdot \dots \\
 & \dots \int \frac{\tau_{KXПП}^i}{\tau_{KXПП}^i} P(BOП^3(1), \dots, BOП^3(KXПП)) \times \\
 & \frac{\tau_{KXПП}^i}{\tau_{KXПП}^i} \times \log \frac{P(BOП^3(1), \dots, BOП^3(KXПП))}{P(BOП^T_j)} \times \\
 & \left. \times dBOП^3(1) \dots dBOП^3(KXПП) \right\},
 \end{aligned}$$

i номер группы в КГ (i= 1. КГ);  
 j номер ХПП в КХПП (j= 1. КХПП);  
 b= 4,132;

$T_j^i, \tau_j^i$  – соответственно математическое ожидание и среднеквадратическое отклонения j-той  $BOП^S$  i-той группы НП, рассчитываемые по формулам

$$T_j^i = \frac{1}{КОГ} \sum_{k=1}^{КОГ} (BOП_k^3),$$

$$d_\mu =$$

$$= \begin{cases} 1, & \text{если } M_{КП}(\mu) - tS_{КП}(\mu) \leq F_{КП}(\mu) \leq M_{КП}(\mu) + tS_{КП}(\mu) (*) \\ 0, & \text{если не выполняется условие } (*) \end{cases}$$

$M_{КП}(\mu)$  и  $S_{КП}(\mu)$  – соответственно математическое ожидание значения и среднеквадратическое отклонение  $\mu$ -того показателя качества, рассчитываемые по формулам

$$M_{КП}(\mu) = \frac{1}{КОГ} \sum_{k=1}^{КОГ} H(\mu, k),$$

$$S_{КП}(\mu) = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{КОГ} (H(\mu, k) - M_{КП}(\mu))^2}{КОГ - 1}},$$

ult  $H(\mu, k)$  известные (заданные в базе данных) числовые значения  $\mu$ -того показателя качества для k-того продукта;

$$\tau_j^i = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{КОГ} (BOП_k^3 - T_j^i)^2}{КОГ - 1}},$$

где  $BOП_k^5$  известные (заданные в базе данных) значения j-той ХПП для k-того продукта группы НП; k порядковый номер объекта в группе НП;

$P(BOП^5(1), BOП^5(KXПП))$  совместная плотность распределения ХПП (для каждой группы);

$d_{BOП^5(1)} \dots d_{BOП^5(KXПП)}$  – дифференциалы;

$P(BOП^T(j))$  условная плотность распределения j-той ХПП (вид плотностей распределения определяется в процессе обработки данных по справочнику); (6) (Справочник по математике для научных работников и инженеров. Определения, теоремы, формулы, М. Наука, 1973, С. 543), при этом после идентификации исследуемого объекта, дополнительно задают количество показателей качества (КП) идентифицированной группы НП, числовые значения  $H(\mu, k)$  показателей качества для идентифицированной группы НП, после чего определяют его качество по критерию С, рассчитываемого по формуле

$$C = \frac{1}{КП} \sum_{\mu=1}^{КП} d_\mu,$$

где КП количество показателей качества, установленных для определенной в ходе идентификации группы НП (по ГОСТам);

$\mu$  порядковый номер показателя качества ( $\mu=1 \dots КП$ ); ;

$d_\mu$  степень соответствия m-того показателя качества кондиции, вычисляемая по формуле

t коэффициент Стьюдента (справочные данные, зависящие от КОГ, являющегося количеством степеней свободы, и принятой доверительной вероятности);

$F_{КП}(\mu)$  расчетное значение  $\mu$ -того показателя качества, определяемое по формуле

$$F_{КП}(\mu) = \frac{1}{KXПП} \sum_{j=1}^{KXПП} \left[ M_{КП}(\mu) + g(\mu, j) \cdot S_{КП}(\mu) \times \frac{BOП^T(j) - T_j^i}{\tau_j^i} \right],$$

где  $g_{\mu, j}$  коэффициент корреляции между

заданным  $\mu$ -тым показателем качества и значе-

ниями всех ( $j=1, R\{GG\}$ ) ХПП для объектов группы НП, определяемый по формуле

$$g(\mu, j) = \frac{\frac{1}{KOG} \sum_{k=1}^{KOG} \left[ H(\mu, j) - M_{KП}(\mu) \right] \cdot \left[ BOП_3(j, k) - T_j^i \right]}{S_{KП}(\mu) \cdot \tau_j^i} \times \frac{(KOG)}{KOG-1};$$

и при величине критерия  $C=1$  продукт определяют как кондиционный.

Таким образом сущность изобретения заключается в получении обобщенного показателя ( $P_{НП}$ ), однозначно характеризующего принадлежность исследуемого объекта к той или иной группе нефтепродуктов и оперативности оценки его качества по полученному критерию (С).

Действительно, исследования ИК-спектров образцов НП, производившиеся на ИК-Фурье-спектрофотометре IFS-113V фирмы "Bruker" в

диапазоне волновых чисел  $4000.400 \text{ см}^{-1}$ , показали, что любой образец НП может быть надежно идентифицирован по характерному набору величин оптических плотностей (ВОП) на соответствующих характеристических полосах поглощения (ХПП) ИК-спектра. Авторами сформирована база данных (БД) для нескольких сотен образцов нефтепродуктов по всей номенклатуре НП (7 Разработка и создание макетного образца АСИ ККГ. Научно-технический отчет 25 ГосНИИ МО РФ, М. 1994), применяемых в народном хозяйстве, и установлена функциональная зависимость между стандартными показателями качества и ИК-спектроскопическими характеристиками (ВОП и ХПП), в дальнейшем

используемыми как заданные величины ( $BOП^S$ ), что позволило в предлагаемом способе использовать эту БД как номенклатуру задаваемых величин.

На чертеже представлена блок-схема устройства, реализующая автоматизированный способ идентификации и определения кондиционности НП.

Способ реализуется следующим образом.

Как уже отмечалось, для реализации способа имеется БД, содержащая набор контрольных (заданных) числовых значений, а именно

количество групп (КГ) НП (справочные данные из ГОСТов и ТУ на НП); (например, ГОСТ В 18241-90 "Масла, смазки и спецжидкости для военной техники", ГОСТ 19461-81 "Топлива для реактивных двигателей");

количество показателей качества (КП) (справочные данные из ГОСТов и ТУ на НП);

количество объектов (КОГ) в каждой группе НП; характеристические полосы поглощения (ХПП) для всех групп НП;

количество (КХПП) характеристических полос поглощения (ХПП) для всех групп НП;

количество показателей качества (КП) для

каждого НП;

числовые значения ( $H_{\mu, k}$ ) показателей качества для всех групп НП; (например, ГОСТ 10224 "Топлива для реактивных двигателей" показатель качества "плотность");

числовые значения величин оптической плотности ( $BOП^S$ ) для каждой ХПП каждого известного образца НП каждой группы НП получены экспериментально;

числовое значение постоянной "в" получена расчетным путем.

порядковые номера групп (i) НП ( $i=1, KГ$ ) (вся номенклатура известных на дату подачи заявки НП, которая произвольно расположена в ряд, порядковый номер присваивается по мере появления очередной марки НП; 1 топливо для реактивных двигателей ТС-1, 2 дизельное топливо Л-0,2-40 и т. д.);

порядковые номера ХПП (j) ( $j=1, KХПП$ );

порядковые номера объекта (k) в группе НП ( $k=1, КОГ$ );

порядковые номера показателей качества ( $\mu$ ).

На первом этапе реализации способа осуществляют идентификацию исследуемого образца НП, для чего вводят через блок 1 ввода данных все

величины для НП: КОГ, ХПП, КХПП,  $BOП^S$ , k, i, j, v, КГ в блок 2 расчета и обработки информации посредством существующей программы. Пробу исследуемого образца НП вводят в ИК-спектрофотометр 3, снимают величины оптической

плотности ( $BOП^T$ ), на всех ХПП. Результаты поступают в блок 2 расчета и обработки информации, в котором осуществляются вычисления следующих величин, рассчитываемых по формулам

$$T_j^i = \frac{1}{KOG} \sum_{k=1}^{KOG} (BOП_k^S), \quad (1)$$

где  $T_j^i$  - математическое ожидание j-той  $BOП^S$  i-той группы НП;

$$\tau_j^i = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{KOG} (BOП_k^S - T_j^i)^2}{KOG-1}}, \quad (2)$$

где  $\tau_j^i$  - среднеквадратичное отклонение j-той

ВОП<sup>5</sup> i-той группы НП,

$$P(i) \log(P(i)) + (1-P(i)) \log(1-P(i)) = \frac{\tau_1^i + \text{ВОП}_1^T}{\tau_1^i - \text{ВОП}_1^T} \cdot \left\{ \sum_{j=1}^{\text{КХПП}} \log(\tau_j^i \cdot B) - \sum_{j=1}^{\text{КХПП}} \frac{\tau_j^i}{\tau_1^i} \right\} \cdot \dots$$

$$\dots \int \frac{\tau_{\text{КХПП}}^i}{\tau_{\text{КХПП}}^i + \text{ВОП}_{\text{КХПП}}^T} P(\text{ВОП}^3(1), \dots, \text{ВОП}^3_{(\text{КХПП})}) \times \frac{\tau_{\text{КХПП}}^i - \text{ВОП}_{\text{КХПП}}^T}{\tau_{\text{КХПП}}^i} P(\text{ВОП}^3(1), \dots, \text{ВОП}^3_{(\text{КХПП})}) \times \log \frac{P(\text{ВОП}^3(1), \dots, \text{ВОП}^3_{(\text{КХПП})})}{P(\text{ВОП}_j^T)} \times d_{\text{ВОП}}^5(1) \dots d_{\text{ВОП}}^5(\text{КХПП}) \Bigg\}, \quad (3)$$

$$g(\mu, j) = \frac{\frac{1}{\text{КОГ}} \sum_{k=1}^{\text{КОГ}} [H(\mu, j) - M_{\text{КП}}(\mu)] \cdot [\text{ВОП}_3(j, k) - T_j^i]}{S_{\text{КП}}(\mu) \cdot \tau_j^i} \times \frac{(\text{КОГ})}{\text{КОГ} - 1}, \quad (7)$$

где  $g_{\mu, j}$  коэффициент корреляции между заданным  $\mu$ -тым показателем качества и значениями поочередно для всех ( $j=1, \dots, \text{КХПП}$ ) ХПП для объектов группы НП,

$$d_{\mu} = \begin{cases} 1, & \text{если } M_{\text{КП}}(\mu) - tS_{\text{КП}}(\mu) \leq F_{\text{КП}}(\mu) \leq M_{\text{КП}}(\mu) + tS_{\text{КП}}(\mu) \quad (*) \\ 0, & \text{если не выполняется условие } (*) \end{cases}$$

где  $d_{\mu}$  степень соответствия  $m$ -то го показателя качества кондиции,

$$C = \frac{1}{\text{КП}} \sum_{i=1}^{\text{КП}} d_{\mu}, \quad (10)$$

где  $C$  критерий, по которому судят о кондиционности НП. При величине  $C=1$  продукт опре-

$$P_{\text{НП}} = \max(P(i), 1-P(i)), \quad (4)$$

где  $P_{\text{НП}}$  величина обобщенного показателя, по которому судят о принадлежности объекта к группе НП (идентифицируют его).

После идентификации объекта через блок 1 вводят известные величины КП,  $H(\mu, k), \mu, t, \dots$ , которые поступают в блок 2 расчета и обработки информации, в котором осуществляются вычисления следующих величин, рассчитываемых по формулам

$$M_{\text{КП}}(\mu) = \frac{1}{\text{КОГ}} \sum_{k=1}^{\text{КОГ}} H(\mu, k), \quad (5)$$

где  $M_{\text{КП}}(\mu)$  математическое ожидание  $\mu$ -то го показателя качества,

$$S_{\text{КП}}(\mu) = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{\text{КОГ}} (H(\mu, k) - M_{\text{КП}}(\mu))^2}{\text{КОГ} - 1}}, \quad (6)$$

где  $S_{\text{КП}}(\mu)$  среднеквадратическое отклонение  $\mu$ -то го показателя качества,

$$F_{\text{КП}}(\mu) = \frac{1}{\text{КХПП}} \sum_{j=1}^{\text{КХПП}} \left[ M_{\text{КП}}(\mu) + g(\mu, j) \cdot S_{\text{КП}}(\mu) \times \frac{\text{ВОП}_j^T - T_j^i}{\tau_j^i} \right],$$

где  $F_{\text{КП}}(\mu)$  расчетное значение  $\mu$ -то го показателя качества,

(9)

деляют как кондиционный. Результат проведения идентификации (принадлежность к конкретной (i) группе НП в соответствии с порядковым (i) номером заданного ряда известных НП) и определения кондиционности исследуемого объекта (в виде значений показателей качества) через блок 4 вывода информации доводятся до пользователя в

виде распечатки паспорта качества на НП.

В таблице представлен фрагмент базы данных для конкретных нефтепродуктов топлив для реактивных двигателей ТС-1 и дизельных топлив Л-0,2-40.

Пример 1. По заложенной программе в блоке 3 рассчитываются по формулам (1) (10) все параметры идентификации и определения кондиционности исследуемого продукта.

Рассчитаем вероятность принадлежности исследуемого объекта группам топлив ТС-1 и Л-0,2-40.

Подставляя значения  $WOP^S$  и КОГ для групп ТС-1 и Л-0,2-40 в формулы (1) и (2), получаем значения математического ожидания и среднеквадратического отклонения рассматриваемой ХПП в этих группах

$$T_1^1 = 0,3 \quad T_1^2 = 0,8$$

$$\tau_1^1 = 0,1 \quad \tau_1^2 = 0,1$$

Подставляя эти значения, а также значения постоянных коэффициентов в формулу (3) и принимая вид плотностей распределения за нормальный, находим значения  $P(1)$  и  $P(2)$ .

$$P(1) = 0,283, \quad P(2) = 0,377.$$

По формуле (4) определим обобщенный показатель, по которому судят о принадлежности к группе НП. Получаем

$$P^{НП} \text{ для ТС-1 } 0,717$$

$$P^{НМ} \text{ для Л-0,2-40} = 0,623$$

Так как  $P_{НП}$  для ТС-1 больше, чем  $P_{НМ}$  для Л-0,2-40, то можем сделать вывод, что исследуемый объект принадлежит к группе ТС-1.

Определим кондиционность продукта.

По формулам (5) и (6), подставляя в них значения  $H(m, k)$  для группы ТС-1, получаем

$$M^{КП} = 790$$

$$S^{КП} = 2$$

Далее, подставляя значения оптических плотностей и показателей качества объектов группы ТС-1 и их математических ожиданий и среднеквадратических отклонений в формулу (7), получим коэффициент корреляции между ХПП  $432 \text{ см}^{-1}$  и плотностью топлив ТС-1:

$$g = 1,0$$

По формуле (8), подставляя в нее полученные значения, получаем значение показателя качества исследуемого объекта

$$F^{КП} = 796$$

Коэффициент Стьюдента  $t$  для количества

степеней свобод  $3$  (КОГ) и доверительной вероятностью  $P^{ДОВ} = 0,95$  (уровень значимости  $0,95$ ) равен  $3,182$ .

Согласно формуле (9) значение  $F^{КП} = 796$  меньше рассчитанного верхнего критического в условии (\*)  $796,36$ , следовательно, условие (\*) выполняется и  $d = 1$ .

Отсюда из формулы (10) определяется значение критерия кондиционности  $C$ , равное  $1$ .

Следовательно, исследуемый по ХПП =  $438$

$\text{см}^{-1}$  и для показателя качества "плотность" продукт признается кондиционным.

Таким образом, заявляемый способ в соответствии с п. 1 ст. 4 Закона отвечает критериям патентоспособности изобретения:

Этот способ является новым, т. к. авторам не известны источники как патентной, так и научно-технической информации (кроме приведенных в описании аналогов и прототипа), в которых была бы представлена вся совокупность отличительных признаков, изложенных в формуле изобретения (математическая зависимость, отражающая взаимосвязь измеряемых технологических показателей и контрольных, используемых в качестве базы данных);

Изобретение имеет изобретательский уровень, т. к. полученный обобщенный показатель ( $P_{НП}$ ), характеризующий принадлежность анализируемого образца к конкретному нефтепродукту и критерий  $C$ , указывающий на кондиционность идентифицированного образца, для любого специалиста явным образом не следует из известного уровня техники, а требуют научных исследований для выявления взаимосвязи между известными показателями качества для всего ряда (i) нефтепродуктов, для каждого из которых выявлены все (j) характеристические полосы поглощения (ХПП);

Способ является промышленно применимым, т. к. имеется программа для реализации способа (8) Комплексная программа разработки и создания автоматизированной системы идентификации и контроля качества горючего в войсках, Утв. командиров войсковой части 25968 27.07.1992 г, г. Москва). Способ является оперативным при использовании компьютера типа IBM PC AT 386/387. Способ реализуется в течение 2,5-15 мин в зависимости от количества объектов, прошел испытание и подтверждает свою эффективность (9 Техническая справка войсковой части 74242. Лабораторные испытания макетного образца АСИ ККГ, М. 1994 г.).

Рекомендован к широкому применению в народном хозяйстве, где используют НП.

### Формула изобретения

Автоматизированный способ идентификации и

определения кондиционности нефтепродуктов (НП),

включающий измерение оптической плотности ИК-спектрофотометром в заданном диапазоне волновых чисел для каждой группы НП и сравнение измеренной величины с заданной, отличающийся тем, что задают количество групп или марок (КГ) НП, количество объектов в группе или марке (КОГ) НП, количество характеристических полос поглощения

(КХПП), величину оптической плотности (ВОП<sup>3</sup>) для каждой характеристической полосы поглощения (ХПП) каждого известного образца НП каждой группы НП, замеряют текущую величину оптической

плотности (ВОП<sup>T</sup>) исследуемого объекта на всех ХПП, а принадлежность (идентификацию) объекта к i-й группе или марке НП определяют по максимальной величине обобщенного показателя (P<sub>НП</sub>), рассчитываемого по следующей зависимости:

$$P_{НП} = \max [P(i), 1 - P(i)]$$

где P(i) параметр, вычисляемый из равенства

$$P(i) \log(P(i)) + (1 - P(i)) \log(1 - P(i)) =$$

$$= \frac{1}{\text{КХПП}} \left\{ \sum_{j=1}^{\text{кхпп}} \log(\tau_j^i \cdot b) - \sum_{j=1}^{\text{кхпп}} \frac{\tau_j^i}{\tau_1^i + \text{ВОП}_1^T} \dots \frac{\tau_1^i - \text{ВОП}_1^T}{\tau_1^i} \right\}$$

$$\dots \int \frac{\tau_{\text{КХПП}}^i + \text{ВОП}_{\text{КХПП}}^T}{\tau_{\text{КХПП}}^i} P(\text{ВОП}^3(1), \dots, \text{ВОП}^3_{(\text{КХПП})}) \times$$

$$\frac{\tau_{\text{КХПП}}^i - \text{ВОП}_{\text{КХПП}}^T}{\tau_{\text{КХПП}}^i} \times \log \frac{P(\text{ВОП}^3(1), \dots, \text{ВОП}^3_{(\text{КХПП})})}{P(\text{ВОП}_j^T)}$$

$$\times d\text{ВОП}^3(1) \dots d\text{ВОП}^3_{(\text{КХПП})} \left. \right\},$$

где i номер группы или марки в КГ (i 1. КГ);

$$d_{\mu} =$$

$$= \begin{cases} 1, & \text{если } M_{\text{КП}(\mu)} - tS_{\text{КП}(\mu)} \leq F_{\text{КП}(\mu)} \leq M_{\text{КП}(\mu)} + tS_{\text{КП}(\mu)} \quad (*) \\ 0, & \text{если не выполняется условие } (*) \end{cases}$$

M<sub>КП(μ)</sub> и S<sub>КП(μ)</sub> – соответственно математическое ожидание значения и среднеквадратическое отклонение μ-го показателя качества, рассчитываемые по формулам

j номер ХПП в КХПП (j1 КХПП);  
b 4,132;

T<sub>j</sub><sup>i</sup>, τ<sub>j</sub><sup>i</sup> – соответственно математическое ожидание и среднеквадратическое отклонение j-й

ВОП<sup>3</sup> i-й группы или марки НП, рассчитываемые по формулам

$$T_j^i = \frac{1}{\text{КОГ}} \sum_{k=1}^{\text{КОГ}} (\text{ВОП}_k^3);$$

$$\tau_j^i = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{\text{КОГ}} (\text{ВОП}_k^3 - T_j^i)^2}{\text{КОГ} - 1}},$$

где ВОП<sub>к</sub><sup>3</sup> известные (заданные в банке данных) значения j-й ХПП для k-го продукта группы НП; k порядковый номер объекта в группе или марке НП;

P [ВОП<sup>3</sup>(1), ВОП<sup>3</sup>(КХПП)] совместная плотность распределения ХПП (для каждой группы или марки);

dВОП<sup>3</sup>(1), dВОП<sup>3</sup>(КХПП) дифференциалы;

P [ВОП<sup>T</sup>(j)] условная плотность распределения j-й ХПП (вид плотностей распределения определяется в процессе обработки данных по справочнику),

при этом после идентификации исследуемого объекта дополнительно задают количество показателей качества (КП) идентифицированной группы или марки НП, числовые значения H(μ, k) показателей качества для идентифицированной группы или марки НП, после чего определяют его качество по критерию C, рассчитываемому по формуле

$$C = \frac{1}{\text{КП}} \sum_{\mu=1}^{\text{кП}} d_{\mu},$$

где КП количество показателей качества, определенных для определенной в ходе идентификации группы или марки НП по ГОСТам,

μ – порядковый номер показателя качества, μ=1 ... КП; ,

d<sub>μ</sub> – степень соответствия μ-го показателя качества кондиции, вычисляемая по формуле

$$M_{\text{КП}(\mu)} = \frac{1}{\text{КОГ}} \sum_{k=1}^{\text{КОГ}} H(\mu, k);$$



$$S_{\text{КП}(\mu)} = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{\text{КОГ}} \left[ H(\mu, k) - M_{\text{КП}(\mu)} \right]^2}{\text{КОГ} - 1}},$$

где  $H(\mu, k)$  – известные (заданные в БД) числовые значения  $\mu$ -го показателя качества для  $k$ -го продукта,

$t$  коэффициент Стьюдента (справочные данные, зависящие от КОГ, являющегося количеством степеней свободы и принятой доверительной вероятности);

$F_{\text{КП}(\mu)}$  – расчетное значение  $\mu$ -го показателя

$$g(\mu, j) = \frac{\frac{1}{\text{КОГ}} \sum_{k=1}^{\text{КОГ}} \left[ H(\mu, j) - M_{\text{КП}(\mu)} \right] \cdot \left[ \text{ВОП}_3(j, k) - T_j^i \right]}{S_{\text{КП}(\mu)} \cdot \tau_j^i} \times$$

$$\times \frac{(\text{КОГ})}{\text{КОГ} - 1}$$

и при величине критерия С 1 продукт опреде-

качества, определяемое по формуле

$$F_{\text{КП}(\mu)} = \frac{1}{\text{КХПП}} \sum_{j=1}^{\text{КХПП}} \left[ M_{\text{КП}(\mu)} + g(\mu, j) \cdot S_{\text{КП}(\mu)} \times \frac{\text{ВОП}^T(j) - T_j^i}{\tau_j^i} \right],$$

где  $g(\mu, j)$  – коэффициент корреляции между заданным  $\mu$ -ым показателем качества и значениями всех ( $j$  1. КХПП) ХПП для объектов группы или марки НП, определяемый по формуле

ляют как кондиционный.

## Таблицы

№№ образцов	Заданные величины											Расчетная величина определяемого показателя качества	
	Кол-во групп (КГ) i=1..КГ	Номер группы (марки) НП (i)	Кол-во объект. (КОГ) К=1...КОГ	Наименование объектов	Кол-во ХПП (КХПП) j=1..КХПП	Знач. ХПП j=8	Оптич. плотн. (ВОП <sup>5</sup> )	Кол-во показ. кач. (КП) $\mu=1...к$	Знач. показ. кач. $\mu=5$	Измер. параметры (ВОП <sup>1</sup> )	По заявляемому способу F <sub>кп</sub>	По известному способу (ГОСТ 3990-85)	
1	30	1	3	ТС-1	100	438	0,2	10	788	0,5	796	795	
2			ТС-1	0,4			792						
3			ТС-1	0,3			790						
1				Л-О, 2-40			0,8		832				
2		2	3	Л-О, 2-40			0,7		841				
3				Л-О, 2-40			0,9		829				

Примечание: Образцы ТС-1 и Л-О, 2-40 с различных НПЗ:

1 - Рязанского НПЗ;

2 - Уфимского НПЗ;

3 - Волгоградского НПЗ.